第 39 卷　第 5 期
2022 年 10 月

应　用　力　学　学　报
Chinese Journal of Applied Mechanics

Vol. 39 No. 5
Oct. 2022


文章编号:1000-4939(2022)05-0938-09

# 计及表面效应的面心立方纳米板弹性性能分析

向品洁,聂国华

(同济大学航空航天与力学学院,200092 上海)

**摘　要:**基于能量原理建立了面心立方纳米板的拟连续介质力学模型,分析了考虑表面原子弛豫影响的面心立方纳米板的弹性常数。该模型假设纳米板沿厚度方向是离散的,但沿面内方向是连续的。基于通过计算最相近原子对和次相近原子对之间的相互作用,获得了材料变形势能。给出了面心立方纳米板的弹性模量和泊松比的解析表达式,结果反映了表征表面效应的驰豫系数的影响。以金属铱为例,通过算例阐述了不同弛豫下弹性常数随厚度的变化,分析了纳米板的弹性模量和泊松比的尺寸效应。

**关键词:**面心立方;纳米板;拟连续介质力学模型;弹性常数;表面效应;尺寸效应

**中图分类号:**O34　　**文献标志码:**A　　**DOI:**10.11776/j.issn.1000-4939.2022.05.016



# Elastic properties of FCC nanoplates taking into account surface effect

XIANG Pinjie, NIE Guohua

(School of Aerospace Engineering and Applied Mechanics, Tongji University, 200092 Shanghai, China)

**Abstract:** A quasi-continuum model for face-centered-cubic (FCC) nanoplates incorporating the effect of surface atomic relaxation is proposed based on the energy principle, and the elastic constants of FCC materials are analyzed. It is assumed that the model is discrete along the thickness direction, but continuous along the in-plane direction. The potential energy of deformation is formulated by analysis of the interactions between the nearest atomic pair and the next nearest atomic pair. The analytical expressions for in-plane and out-of-plane elastic moduli and Poisson's ratios of such nano materials are presented, and the surface effect is evaluated by magnitude of an introduced relaxation coefficient. As an example, iridium metal is chosen as the material in computational model. The changes in elastic constants with the thickness are given for different values of the relaxation coefficient, and the size effect of elastic moduli and Poisson's ratios is analyzed.

**Key words:** FCC; nanoplate; quasi-continuum model; elastic constant; surface effect; size effect

纳米材料是指在三维空间中至少有一维处于纳米尺寸(1 ~ 100 nm)的材料,这相当于大约 10 ~ 1 000个原子紧密排列在一起的尺度[1]。自 1984 年德国学者萨尔兰大学 Gleiter 教授首次人工制备得到

**收稿日期:**2021-03-08　　**修回日期:**2021-05-12
**通信作者:**聂国华。E-mail: ghnie@tongji.edu.cn
**引用格式:**向品洁,聂国华. 计及表面效应的面心立方纳米板弹性性能分析[J]. 应用力学学报,2022,39(5):938-946.
XIANG Pinjie, NIE Guohua. Elastic properties of FCC nanoplates taking into account surface effect[J]. Chinese journal of applied mechanics, 2022,39(5):938-946.

块状纳米晶体[2]，近年来，纳米材料被广泛应用于各个工业领域[3]，如电子信息产业[4-6]、生物技术产业[7-11]和化学工业[12-14]。

由于纳米材料的尺寸小、比表面积大、表面能大、表面原子比大，不同于块状材料，纳米材料表现出特殊的力学性能，如尺寸效应和表面效应[15-16]。为了更客观、更具体地理解和描述纳米材料的特性，人们进行了大量的力学理论研究，包括弹性特性、振动特性、屈服强度、应变硬化、塑性性能、疲劳强度、断裂韧性、热弹性响应[17]、屈曲和一些其他机械性能等[18]。其中，弹性特性对纳米材料的稳定性有着重要的影响，这是纳米材料广泛应用的关键[19]。为了探究纳米材料的弹性特性，各种理论方法被运用于相关的理论研究当中。诸如嵌入原子法(embedded atom method，EAM)[20]、分子静力学与第一性原理的结合[21]、基于界面能密度的理论[22]、结合原子模拟的降阶模型[23]等都被运用到印证纳米材料弹性模量的尺寸效应当中。

从上述分析理论出发，纳米材料的弹性性能可以用两种方法来进行研究，即原子力学方法和连续介质力学方法。一方面，分子动力学(molecular dynamics，MD)方法作为典型的原子方法，它是通过选择适当的势函数来进行数值计算。该方法可以提高分析的准确性，但牺牲了分析的时效性[24-25]。另一方面，连续介质理论也适用于特定条件下的纳米尺度分析[26]，通过从理论结果中得到精确的表达式，可减少大量的计算量和计算时间，但其计算精度相对较低。为了综合上述 2 种方法的优点，Shenoy 等[27]提出了一种拟连续介质方法。在此基础之上，Sun 和 Zhang[28-29]提出了一种基于拟连续介质方法的简单立方晶体结构的板状纳米材料力学模型。该模型假设简单立方纳米板沿厚度方向具有离散性，沿面内方向满足连续介质力学要求，仅考虑每个原子与其最相近和次相近原子的相互作用，且相互作用用弹簧来表示。在此基础上，Nie 和 Ye[30-31]以及 Guo 和 Zhao[32-33]等进一步考虑了表面效应的影响。相对于具有简单立方晶体结构的材料，具有面心立方晶体结构的材料在自然界中是常见的，例如金属铜、铝、金、银、铱、镍等，这些都是如今所被广泛应用的材料[34]。Chang 等[35]构建了面心立方超薄膜的三维晶格模型，以研究不同晶体取向下弹性模量的尺寸依赖性。考虑到表面原子的弛豫对弯曲分析、表面能密度和有效弹性模量的尺寸效应有一定的影响[29-32,36-37]，在纳米材料的弹性性能研究中，表面原子的弛豫是一个非常值得考虑的问题。

本研究基于拟连续介质力学模型，考虑表面原子弛豫的影响，导出了用弹簧刚度、晶格常数、弛豫系数和表征原子层的数目表示的杨氏模量和泊松比的表达式。在此基础上，通过计算分析了表面效应和纳米板厚度定义的模糊性对弹性常数的影响，阐述了不同弛豫系数下纳米板的杨氏模量和泊松比随厚度的变化规律。

## 1　拟连续介质力学模型

本研究建立的理论模型是以面心立方为结构单元的拟连续介质力学模型。如图 1 所示，具有均匀厚度 $h$ 的纳米板，中间层有平面轴 $x$ 和 $y$，垂直于中间层有 $z$ 轴。图中的离散圆表示原子，面心立方晶体的晶格常数为 $a$。在第 $k$ 原子层和第 $k+1/2$ 原子层上的原子记为在相同原子层上的面心立方晶格内，即第 $k$ 层原子层上的面心立方晶格，其中 1/2 被用来表示在立方面中间的原子。沿厚度方向，共有 $4N+1$ $(N=1,2,3,\cdots)$层原子，$2N$ 层面心立方晶格。

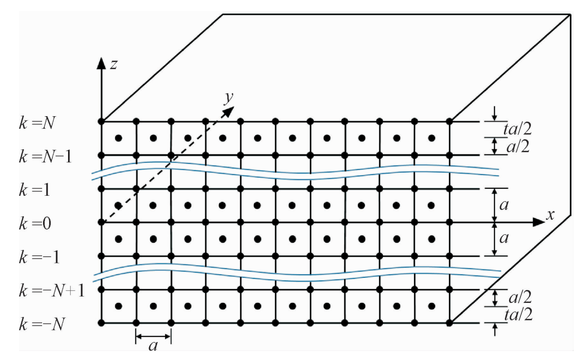



图 1　拟连续介质力学模型(示意图)

Fig. 1　Quasi-continuum model (schematic diagram)

本研究模型针对板状纳米材料有如下基本假定：考虑纳米板在面内方向具有连续性，沿厚度方向具有离散性；与厚度方向相比，在平面方向上的尺寸要大得多，而厚度和晶格常数的比值 $h/a$ 是有限的；仅考虑最相近的和次相近的原子之间的相互作用，其他较远距离的相互作用可以忽略。同时，由于上述面内方向的连续性假设(即尺寸相对于厚度大数量级)，本研究仅考虑最外层原子沿板厚方向的弛豫效应。

已有的研究结果表明[38]，仅需考虑最外层原子的弛豫即可，并可通过引入弛豫系数 $t$ 来实现[39]。$t<1$表示最外层原子向内收缩；$t=1$ 表示不考虑最外层原子的弛豫现象；$t>1$ 表示最外层原子向外膨

胀。不同的材料由于其自身的性质，$t$ 的取值也会有所不同。

在本研究模型的推导中，虽仅考虑了原子层数为奇数的情况，其也适用于原子层数为偶数的纳米板。原子间相互作用用弹性系数为 $\alpha_1$、$\alpha_2$、$\alpha_3$ 和 $\alpha_4$ 的弹簧表示[40]。如图 2(a)所示，$\alpha_1$ 表示最相近原子间相互作用的等效弹簧的刚度，相应地，$\alpha_2$ 表示次相近原子间相互作用的等效弹簧的刚度。$\alpha_3$ 和 $\alpha_4$ 则分别表示最外层原子发生弛豫后最相近和次相近原子间相互作用的等效弹簧的刚度。如图 2(b)所示，晶胞底面即为最外层原子。

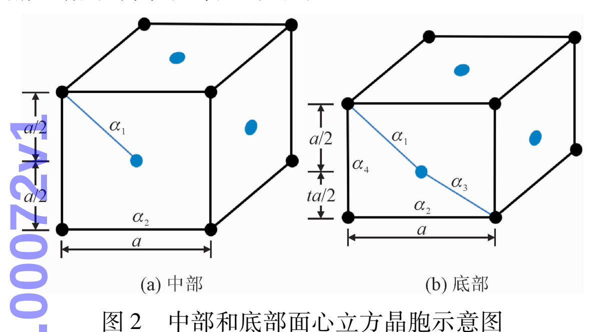



图 2　中部和底部面心立方晶胞示意图

Fig. 2　Schematic diagram of FCC cell in the middle and the bottom

为了通过计算原子间相互作用得到纳米板的能量表达式，选取一个代表性的面心立方单元体，如图 3 所示。定义单元中各原子的坐标如下。

1：$(x_i, y_j, z^k)$；2：$(x_{i+1}, y_j, z^k)$；3：$(x_i, y_{j+1}, z^k)$；

4：$(x_{i+1}, y_{j+1}, z^k)$；5：$(x_{i+1/2}, y_{j+1/2}, z^k)$；

6：$(x_{i+1/2}, y_j, z^{k+1/2})$；7：$(x_{i+1}, y_{j+1/2}, z^{k+1/2})$；

8：$(x_{i+1/2}, y_{j+1}, z^{k+1/2})$；9：$(x_i, y_{j+1/2}, z^{k+1/2})$；

10：$(x_i, y_j, z^{k+1})$；11：$(x_{i+1}, y_j, z^{k+1})$；

12：$(x_i, y_{j+1}, z^{k+1})$；13：$(x_{i+1}, y_{j+1}, z^{k+1})$；

14：$(x_{i+1/2}, y_{j+1/2}, z^{k+1})$。

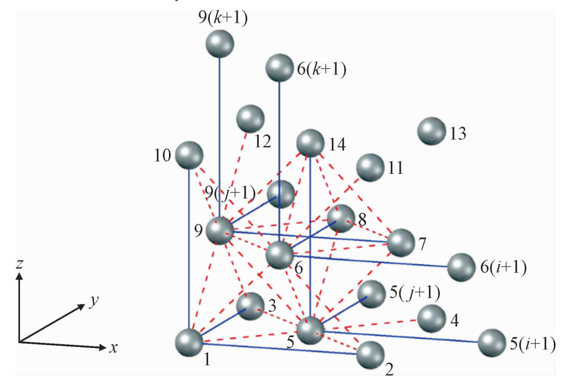



图 3　单位面心立方晶体及其独有等效弹簧

Fig. 3　Unit FCC crystal and its unique equivalent springs

图 3 中，虚线和实线分别表示最相近原子间和次相近原子间的等效弹簧。

单位面心立方晶体内共有 24 个最相近原子间的等效弹簧和 12 个次相近原子间的等效弹簧。用 $U_{1-2}^k$ 表示原子 1 和原子 2 之间的等效弹簧伸缩所引起的形变能，其他以此类推。特别地，$U_{6-6(k+1)}^k$ 表示原子 6 与该面心立方晶胞上方的晶胞的原子 6 之间的相互作用。接下来将介绍次相近的相互作用势能 $U_{1-10}^k$ 和最相近的相互作用势能 $U_{1-6}^k$ 的推导过程，其余相互作用势能推导过程与之类似。其中，$u$、$v$、$w$ 分别表示各原子弛豫后沿坐标轴 $x$、$y$、$z$ 方向上的位移。

$$U_{1-10}^k = \frac{1}{2}\alpha_n\left(w^{k+1}(x_i, y_j) - w^k(x_i, y_j)\right)^2 \tag{1}$$

其中

$$\alpha_n = \begin{cases}\alpha_4 & k = -N, N-1 \\ \alpha_2 & k \neq -N, N-1\end{cases} \tag{2}$$

由于每个原子层中从原子到原子的位移的变化很缓慢，所以可以使用二元泰勒级数展开，忽略高阶项的影响。例如，位移 $u^{k+1/2}(x_{i+1/2}, y_j)$ 可以近似地以位移 $u^{k+1/2}(x_i, y_j)$ 来表示，即

$$u^{k+1/2}(x_{i+1/2}, y_j) \approx u^{k+1/2}(x_i, y_j) + \frac{a}{2}\frac{\partial u^{k+1/2}(x, y)}{\partial x}\bigg|_{(x_i, y_j)} \tag{3}$$

原子 1 和原子 6 之间等效弹簧的长度变化可以写成

$$\sqrt{\left(\frac{a}{2} + u^{k+1/2}(x_{i+1/2}, y_j) - u^k(x_i, y_j)\right)^2 + \left(h_k + w^{k+1/2}(x_{i+1/2}, y_j) - w^k(x_{i+1/2}, y_j)\right)^2} - \sqrt{\left(\frac{a}{2}\right)^2 + h_k^2} \tag{4}$$

式中，$h_k$ 是第 $k$ 层原子和第 $k+1/2$ 层原子之间的层间距，其表达式为

$$h_k = \begin{cases}\dfrac{ta}{2} & k = -N, N-\dfrac{1}{2} \\ \dfrac{a}{2} & k \neq -N, N-\dfrac{1}{2}\end{cases} \tag{5}$$

同样通过使用级数展开，略去高阶项，原子 1 和原子 6 之间的等效弹簧的长度变化量可以重写为

$$\frac{a/2}{\sqrt{\left(\frac{a}{2}\right)^2 + h_k^2}}\left(u^{k+1/2}(x_i, y_j) - u^k(x_i, y_j) + \frac{a}{2}\frac{\partial u^{k+1/2}(x, y)}{\partial x}\bigg|_{(x_i, y_j)}\right) + \frac{h_k}{\sqrt{\left(\frac{a}{2}\right)^2 + h_k^2}}\left(w^{k+1/2}(x_i, y_j) - w^k(x_i, y_j) + \frac{a}{2}\frac{\partial w^{k+1/2}(x, y)}{\partial x}\bigg|_{(x_i, y_j)}\right) \tag{6}$$

因此，形变能 $U_{1-6}^{k}$ 的表达式可写成

$$U_{1-6}^{k}=\frac{2\alpha_m a^2}{a^2+4h_k^2}\cdot\left[\frac{a}{2}\left(\frac{u^{k+1/2}(x_i,y_j)-u^{k}(x_i,y_j)}{a}+\frac{1}{2}\frac{\partial u^{k+1/2}(x,y)}{\partial x}\bigg|_{(x_i,y_j)}\right)+h_k\left(\frac{w^{k+1/2}(x_i,y_j)-w^{k}(x_i,y_j)}{a}+\frac{1}{2}\frac{\partial w^{k+1/2}(x,y)}{\partial x}\bigg|_{(x_i,y_j)}\right)\right]^2 \tag{7}$$

其中

$$\alpha_m=\begin{cases}\alpha_3 & k=-N\\ \alpha_1 & k\neq -N,N-1\end{cases} \tag{8}$$

值得注意的是，$U_{6-6(k+1)}^{k}$ 和 $U_{9-9(k+1)}^{k}$ 只存在于第 $-N$ 层到第 $N-2$ 层之间的面心立方晶格，而 Chang 等[34]计算时取的是第 $-N$ 层到第 $N-1$ 层之间的面心立方晶格，事实上，如图 4 所示，位于纳米板顶端的面心立方单元没有相应的这 2 个等效弹簧。

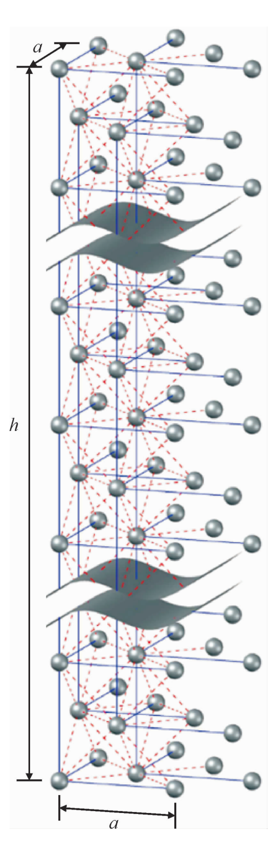



图 4　面心立方纳米板体单元 $a\times a\times h$

Fig. 4　The volume element $a\times a\times h$ of the nanoplate

因此，面心立方体单元 $a\times a\times h$ 在平面位置为 $(x_i,y_j)$ 的这个体单元的应变能为

$$\begin{aligned}U_1=&\sum_{k=-N}^{N}(U_{1-5}^{k}+U_{2-5}^{k}+U_{3-5}^{k}+U_{4-5}^{k}+U_{1-2}^{k}+\\&U_{1-3}^{k}+U_{5-5(i+1)}^{k}+U_{5-5(j+1)}^{k})+\\&\sum_{k=-N}^{N-1}(U_{1-6}^{k}+U_{1-9}^{k}+U_{2-6}^{k}+U_{3-9}^{k}+U_{5-6}^{k}+U_{5-7}^{k}+\\&U_{5-8}^{k}+U_{5-9}^{k}+U_{6-7}^{k}+U_{6-9}^{k}+U_{6-10}^{k}+U_{6-11}^{k}+\\&U_{6-14}^{k}+U_{7-8}^{k}+U_{7-14}^{k}+U_{8-9}^{k}+U_{8-14}^{k}+\\&U_{9-10}^{k}+U_{9-12}^{k}+U_{9-14}^{k}+U_{1-10}^{k}+U_{5-14}^{k}+\\&U_{6-8}^{k}+U_{7-9}^{k}+U_{6-6(i+1)}^{k}+U_{9-9(j+1)}^{k})+\\&\sum_{k=-N}^{N-2}U_{6-6(k+1)}^{k}+U_{9-9(k+1)}^{k}\end{aligned} \tag{9}$$

## 2　面心立方纳米板的杨氏模量和泊松比

考虑纳米板的小变形情况，其应变可表示为[35]

$$\begin{cases}\varepsilon_x=\dfrac{\partial u}{\partial x}=\dfrac{\partial u^{(k,k+1/2,k+1)}(x,y)}{\partial x}\bigg|_{(x_i,y_j)}\\ \varepsilon_y=\dfrac{\partial v}{\partial y}=\dfrac{\partial v^{(k,k+1/2,k+1)}(x,y)}{\partial y}\bigg|_{(x_i,y_j)}\\ \varepsilon_z=\dfrac{w^{k_2}(x_i,y_j)-w^{k_1}(x_i,y_j)}{z^{k_2}-z^{k_1}}\\ \gamma_{yz}=\dfrac{\partial w^{(k_1,k_2)}(x,y)}{\partial x}\bigg|_{(x_i,y_j)}+\dfrac{v^{k_2}(x_i,y_j)-v^{k_1}(x_i,y_j)}{z^{k_2}-z^{k_1}}\\ \gamma_{xz}=\dfrac{\partial w^{(k_1,k_2)}(x,y)}{\partial x}\bigg|_{(x_i,y_j)}+\dfrac{u^{k_2}(x_i,y_j)-u^{k_1}(x_i,y_j)}{z^{k_2}-z^{k_1}}\\ \gamma_{xy}=\dfrac{\partial u}{\partial y}+\dfrac{\partial v}{\partial x}\\ \quad=\dfrac{\partial u^{(k,k+1/2,k+1)}(x,y)}{\partial y}\bigg|_{(x_i,y_j)}+\dfrac{\partial v^{(k,k+1/2,k+1)}(x,y)}{\partial x}\bigg|_{(x_i,y_j)}\end{cases} \tag{10}$$

其中，$k_1$ 和 $k_2$ 是 $k$、$k+1/2$ 和 $k+1$ 的两两组合。

因此，单位单元内等效弹簧的应变能将被重写。例如

$$U_{1-10}^{k}=\frac{1}{2}\alpha_n\,(h_{k+1/2}+h_k)^2\varepsilon_z^2 \tag{11}$$

$$U_{1-6}^{k}=\frac{\alpha_m a^2 h_k^2}{2(a^2+4h_k^2)}\left(\frac{a}{2h_k}\varepsilon_x+\frac{2h_k}{a}\varepsilon_z+\gamma_{xz}\right)^2 \tag{12}$$

将各等效弹簧应变能代入式(9)中可得面心立方体单元 $a\times a\times h$ 的应变能 $U_1$，定义面心立方纳米板的平均应变能密度为

$$\begin{aligned}v_\varepsilon&=U_1/a^2h\\&=\frac{1}{h}\Big\{\left(N-\frac{1}{2}\right)\alpha_1[(\varepsilon_x+\varepsilon_z)^2+(\gamma_{xz})^2+(\varepsilon_y+\varepsilon_z)^2+(\gamma_{yz})^2]+\\&\left(N+\frac{1}{4}\right)[4\alpha_2((\varepsilon_x)^2+(\varepsilon_y)^2)+\alpha_1((\varepsilon_x+\varepsilon_y)^2+(\gamma_{xy})^2)]+\\&(4N-3)\alpha_2\,(\varepsilon_z)^2+2\alpha_4\left(\frac{1+t}{2}\right)^2(\varepsilon_z)^2+\\&\frac{\alpha_3}{1+t^2}[(\varepsilon_x+t^2\varepsilon_z)^2+t^2\,(\gamma_{xz})^2+(\varepsilon_y+t^2\varepsilon_z)^2+t^2\,(\gamma_{yz})^2]\Big\}\end{aligned} \tag{13}$$

由广义胡克定律[41]，可得刚度矩阵中的非零常数为

$$\begin{cases} C_{11}=C_{22}=\dfrac{(4N-1/2)\alpha_1+(8N+2)\alpha_2+\dfrac{2}{1+t^2}\alpha_3}{h} \\ C_{12}=C_{21}=C_{66}=\dfrac{(2N+1/2)\alpha_1}{h} \\ C_{33}=\dfrac{(4N-2)\alpha_1+(8N-6)\alpha_2+\dfrac{4t^4}{1+t^2}\alpha_3+(1+t^2)\alpha_4}{h} \\ C_{13}=C_{31}=C_{23}=C_{32}=C_{44}=C_{55}=\dfrac{(2N-1)\alpha_1+\dfrac{2t^2}{1+t^2}\alpha_3}{h} \end{cases} \tag{14}$$

通过对以上刚度矩阵求逆，可以得到对应的柔度矩阵。由应力应变的关系，可以获得各弹性模量表达式为

$$\begin{cases} E_x=E_y=\dfrac{(C_{11}-C_{12})(C_{11}C_{33}+C_{12}C_{33}-2C_{13}^2)}{C_{11}C_{33}-C_{13}^2} \\ E_z=\dfrac{C_{11}C_{33}+C_{12}C_{33}-2C_{13}^2}{C_{11}+C_{12}} \\ \nu_{xy}=\nu_{yx}=\dfrac{C_{12}C_{33}-C_{13}^2}{C_{11}C_{33}-C_{13}^2} \\ \nu_{xz}=\nu_{yz}=\nu_{zx}=\nu_{zy}=\dfrac{C_{13}}{C_{11}+C_{12}} \\ G_{xz}=G_{yz}=C_{13} \\ G_{xy}=C_{12} \end{cases} \tag{15}$$

定义单原子层的厚度为该层与其上下相邻层之间的间距各取一半的和，如图 5 所示。

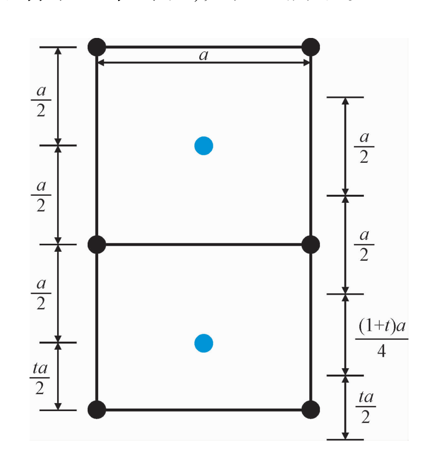



图 5 单原子层厚度示意图

Fig. 5 Schematic diagram of monatomic layer thickness

由于纳米板的厚度是无法明确定义[42]，若纳米板的厚度 $h$ 定义为原子层间距的总和，则 $h=(2N+t-1)a$；若 $h$ 定义为所有原子层厚度之和，则 $h=(2N+3t/2-1)a$。引入关于厚度的模糊参数 $\beta$[31]，定义板厚 $h$ 的表达式为

$$h=\left(2N+\frac{3}{2}t-1-\beta\right)a \tag{16}$$

定义 $\alpha_3$、$\alpha_4$ 和 $\alpha_1$、$\alpha_2$ 的关系为

$$\alpha_3=\frac{\alpha_1}{t},\alpha_4=\frac{\alpha_2}{t} \tag{17}$$

与块体(bulk)材料相对应的极端情况($N\to\infty$)，由式(14)~(15)可得纳米板的杨氏模量和泊松比的极限值为

$$\begin{cases} E_C=(E_{x,y,z})_C=\dfrac{4(\alpha_1+4\alpha_2)(\alpha_1+\alpha_2)}{(3\alpha_1+4\alpha_2)a} \\ \nu_C=(\nu_{xy})_C=(\nu_{xz})_C=(\nu_{yz})_C=\dfrac{\alpha_1}{3\alpha_1+4\alpha_2} \end{cases} \tag{18}$$

特别地，杨氏模量和泊松比的极值仅由弹簧刚度和晶格常数 $a$ 来决定。在此基础上，可以通过块体材料杨氏模量和泊松比的值以及晶格常数 $a$ 的值推导得出弹簧刚度的值。因此，只要确定原子层的总层数以及弛豫系数 $t$ 的取值，即可求出纳米板的杨氏模量和泊松比。

## 3 算例与分析

以具有面心立方晶体结构的金属铱为例，其晶格常数为 0.383 9 nm，杨氏模量和泊松比的相应实验体积值为 572 GPa 和 0.24[43]。因此，可以利用式(18)计算得到等效弹簧的刚度为 $\alpha_1=81.73$ N/m，$\alpha_2=23.83$ N/m。

### 3.1 忽略表面效应的结果

Chang 等[35]分析面心立方薄膜材料的弹性性能时，未考虑表面效应的影响以及厚度定义的模糊性。为了比较，在本研究模型中，取弛豫系数 $t=1$，即忽略表面效应的影响；同时，取厚度模糊参数 $\beta=-1/2$，使厚度 $h=(2N+1)a$ 与文献[35]中的厚度定义相同。相关弹性模量和泊松比的计算结果比较如图 6 所示。

计算表明，本研究与 Chang 等人的结果基本吻合。二者的差异源于第一节中提及的该文中多余计算了纳米板顶端面心立方单元的 2 个等效弹簧形变能。

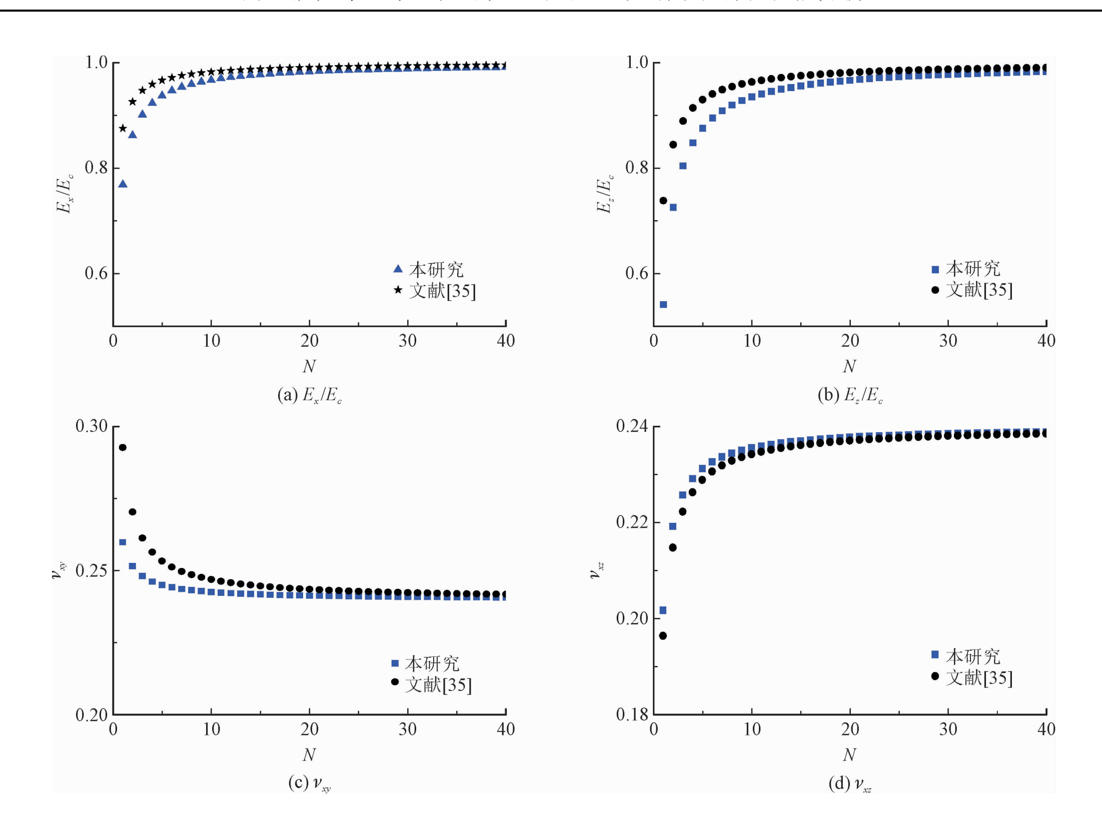



图 6　杨氏模量和泊松比随厚度的变化

Fig. 6　The variations of Young's modulus and Poisson's ratio with thickness



### 3.2　表面效应对弹性常数的影响

当确定了厚度模糊参数 $\beta$ 和弛豫系数 $t$ 时，可以确定 4 个弹性常数随原子层数的变化。确定 $\beta$ 的值，可以得到一个 $t_c$，使得当 $t < t_c$时，弹性常数随着原子层数增加而减小；$t > t_c$时，弹性常数随着原子层数增加而增加。同样，只要确定 $t_c$的值，$\beta$ 的特征值也可以被确定。令 $t_c = 1$，则使得弹性常数 $C_{11}$、$C_{12}$、$C_{13}$和 $C_{33}$的值与纳米板尺寸无关的 $\beta$ 的 4 个特征值为

$$\beta_1 = \frac{\alpha_1}{4(\alpha_1 + 2\alpha_2)},\ \beta_2 = 0,\ \beta_3 = \frac{1}{2},$$

$$\beta_4 = \frac{\alpha_1 + 6\alpha_2}{2(\alpha_1 + 2\alpha_2)}$$

图 7 为各弹性常数在 $\beta$ 取相应特征值时，不同弛豫系数下随厚度的变化。

当表征原子层的数目(板厚)趋于无穷大时，由图 7 可知，弹性常数 $C_{11}$、$C_{12}$、$C_{13}$和 $C_{33}$分别趋向于某个值，分别为 $C_{11} = C_{33} =$674 GPa 和 $C_{12} = C_{13} =$ 213 GPa。因此，当材料的尺度为宏观时，各向异性纳米板回到各向同性，弹性常数不再依赖于尺寸和表面弛豫。且各弹性常数均有，当 $t < 1$ 时，弹性常数随着原子层数增加而减小；$t > 1$ 时，弹性常数随着原子层数增加而增加。$t$ 与 1 的偏量值越大，弹性常数随原子层数的增加而变化得越快。

### 3.3　杨氏模量和泊松比随纳米板厚度的变化

取厚度模糊参数 $\beta = \beta_2 = 0$，观察弛豫系数 $t$ 取不同值时杨氏模量和泊松比随厚度的变化情况，如图 8 所示。

结果表明，随着纳米板的变厚，杨氏模量和泊松比均越来越趋近于极限值。其中，面内弹性模量 $E_x$和面内泊松比 $v_{xy}$的变化趋势与弛豫系数 $t$ 的取值有关，随着 $t$ 的增大，前者随纳米板厚度变薄而增大的趋势逐步变为减小，后者则相反。而面外弹性模量 $E_z$和面外泊松比 $v_{xz}$均随纳米板厚度增加而增大，$t$ 仅影响其随厚度变化的快慢。

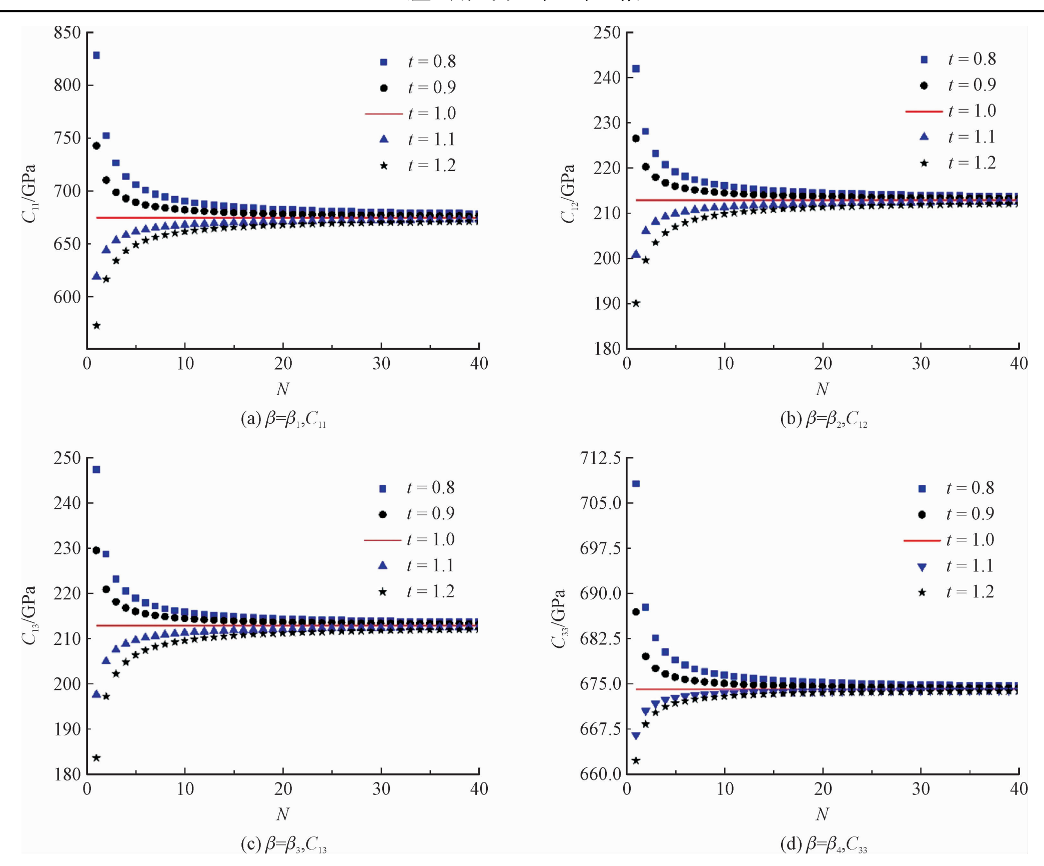



图 7 不同弛豫系数下各弹性常数随厚度的变化

Fig. 7 The variations of elastic constants with thickness under different relaxation coefficients

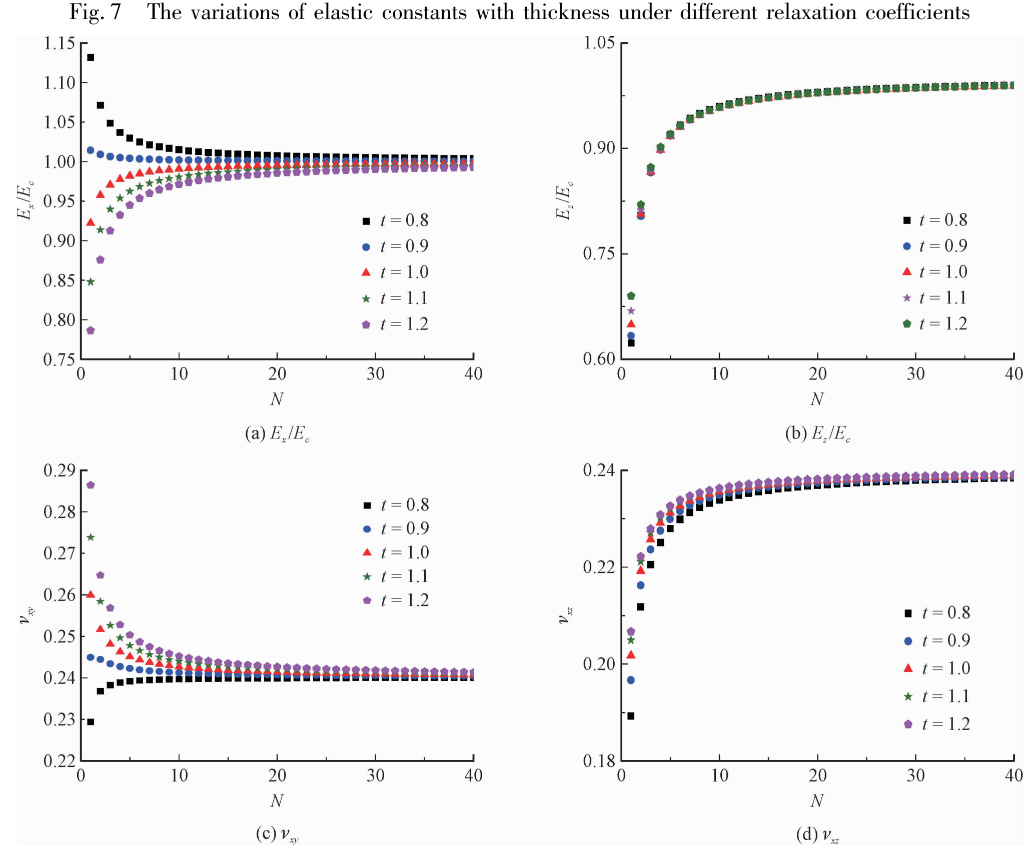



图 8 不同弛豫系数下杨氏模量和泊松比随厚度的变化

Fig. 8 The variations of Young's modulus and Poisson's ratio with thickness under different relaxation coefficient

## 4 结　论

本研究提出了一种能较准确反映纳米板力学行为的拟连续介质力学模型。通过引入弛豫系数来修正表面原子的晶格常数以考虑表面效应,并采用一个参数来确定纳米板厚度的模糊性。应用能量原理推导了纳米板的弹性常数表达式,给出了杨氏模量和泊松比的解析表达式。特别地,当弛豫系数 $t$ 取值为 1 时,可简化得到忽略弛豫效应的影响。计算结果表明,当弛豫系数 $t<1$ 或 $t>1$ 时,弹性常数随原子层的增加而减小或增大。并且,面外杨氏模量和面外泊松比总随着纳米板的变厚而增大,与弛豫系数的取值无关,而面内杨氏模量和面内泊松比的变化趋势除了与纳米板厚度相关外,还与最外层原子的弛豫有关,即纳米板的面内杨氏模量和面内泊松比是软化还是硬化取决于自身材料的特性。



**参考文献:**


[1] 时东陆,郭子政,NICHOLAS B. 纳米材料与器件[M]. 北京:清华大学出版社,2015.

[2] GLEITER H. Nanocrystalline materials[J]. Progress inmaterials science,1989,33(4):223-315.

[3] LUTHER W. Industrialapplication of nanomaterials-Chances and risks[M]. Düsseldorf:Future Technologies,2004.

[4] ENGEL M,FARMER D B,AZPIROZ J T,et al. Graphene-enabled and directed nanomaterial placement from solution for large-scale device integration[J]. Nature communications,2018,9(1):4095.

[5] LIU S,LIU X,ZHOU G,et al. A high-efficiency bioinspired photoelectric-electromechanical integrated nanogenerator[J]. Nature communications,2020,11(1):6158.

[6] ZHANG C,ZOU C L,ZHAO Y,et al. Organic printed photonics:From microring lasers to integrated circuits[J]. Science advances,2015,1(8):150025.

[7] FRIES C N,CURVINO E J,CHEN J L,et al. Advances in nanomaterial vaccine strategies to address infectious diseases impacting global health[J]. Nature nanotechnology,2020,16(4):1-14.

[8] KENRY,GELDERT A,LIU Y,et al. Nano-bio interactions between carbon nanomaterials and blood plasma proteins:Why oxygen functionality matters[J]. NPG Asia materials,2017,9(8):422.

[9] MAKABENTA J M V,NABAWY A,LI C H,et al. Nanomaterial-based therapeutics for antibiotic-resistant bacterial infections[J]. Nature reviews microbiology,2021,19:23-36.

[10] TSOI K M,MACPARLAND S A,MA X Z,et al. Mechanism of hard-nanomaterial clearance by the liver[J]. Nature materials,2016,15(11):1212-1221.

[11] YANG S T,LIU Y,WANG Y W,et al. Biosafety and bioapplication of nanomaterials by designing protein-nanoparticle interactions[J]. Small,2013,9(9/10):1635-1653.

[12] CHOI Y,LEE S Y. Biosynthesis of inorganic nanomaterials using microbial cells and bacteriophages[J]. Naturereviews chemistry,2020,4(12):638-656.

[13] TIAN J,XU J,ZHU F,et al. Application of nanomaterials in sample preparation[J]. Journal of chromatography A,2013,1300:2-16.

[14] YANG D,KANG K,KIM D,et al. Fabrication of heterogeneous nanomaterial array by programmable heating and chemical supply within microfluidic platform towards multiplexed gas sensing application[J]. Scientific reports,2015,5(1):8149.

[15] KIM K H,HUSAKOU A,HERRMANN J. Linear and nonlinear optical characteristics of composites containing metal nanoparticles with different sizes and shapes[J]. Optics express,2010,18(7):7488-7496.

[16] YANG S B,FENG X L,MÜLLEN K. Sandwich-like,graphene-based titania nanosheets with high surface area for fast lithium storage[J]. Advanced materials,2011,23(31):3575-3579.

[17] 梅靖,陈鼎,杨博. 石墨烯增强功能梯度材料板条的热弹性响应[J]. 应用力学学报,2020,37(5):1857-1863.
MEI Jing,CHEN Ding,YANG Bo. Thermo-elastic response of functionally graded graphene reinforced strips[J]. Chinese journal of applied mechanics,2020,37(5):1857-1863(in Chinese).

[18] MEYERS M A,MISHRA A,BENSON D J. Mechanical properties of nanocrystalline materials[J]. Progress in materials science,2006,51(4):427-556.

[19] LIANG L H,MA H S,WEI Y G. Size-dependent elastic modulus and vibration frequency of nanocrystals[J]. Journal of nanomaterials,2011,2011(1):670857.

[20] CAI J,WANG Y D,HUANG Z W. Effect of size on energy and elastic constants of Ni nanoparticles studied using the embedded-atom method[J]. Modelling and simulation in materials science and engineering,2013,21(3):35010.

[21] ZHOU L,HUANG H C. Are surfaces elastically softer or stiffer?[J]. Applied physics letters,2004,84(11):1940-1942.

[22] YAO Y,CHEN S H,FANG D N. An interface energy density-based theory considering the coherent interface effect in nanomaterials[J]. Journal of the mechanics and physics of solids,2017,99:321-337.

[23] SAJADI B,WAHLS S,HEMERT S V,et al. Nonlinear dynamic identification of graphene's elastic modulus via reduced order modeling of atomistic simulations[J]. Journal of the mechanics and physics of solids,2019,122:161-176.

[24] ALLEN M P,TILDESLEY D J. Computer simulation in chemical physics[M]. Nato science series C. Heidelberg:Springer Netherlands,1993.

[25] ALLEN M P,TILDESLEY D J,BANAVAR J R. Computer simulation of liquids[M]. New York:Oxford University Press,1989.

[26] GAO H J,HUANG Y G,ABRAHAM F F. Continuum and atomistic studies of intersonic crack propagation[J]. Journal of the mechanics and physics of solids,2001,49(9):2113-2132.

[27] SHENOY V B,MILLER R,TADMOR E B,et al. An adaptive finite

element approach to atomic-scale mechanics—the quasicontinuum method[J]. Journal of the mechanics and physics of solids,1999,47(3):611-642.

[28] SUN C T,ZHANG H T. Size-dependent elastic moduli of platelike nanomaterials[J]. Journal of applied physics,2003,93(2):1212-1218.

[29] ZHANG H T,SUN C T. Nanoplate model for platelike nanomaterials[J]. AIAA journal,2004,42(10):2002-2009.

[30] NIE G H,YE H. Elastic constants of ultra-thin plate-type nano-materials using a quasi-continuum model[C]//Proceedings of the International Conference on Heterogeneous Materials Mechanics (ICHMM-2004). Chongqing: Chongqing University Press, 2004: 467-470.

[31] NIE G H,YE H. A quasi-continuum model for ultra-thin plate-type nano-materials and its application to bending of such plate structures[J]. Key engineering materials, 2006, 306/307/308: 1097-1102.

[32] GUO J G, ZHAO Y P. The size-dependent elastic properties of nanofilm with surface effects[J]. Journal of applied physics,2005,98(7):74306.

[33] GUO J G,ZHAO Y P. The size-dependent bending elastic properties of nanobeams with surface effects[J]. Nanotechnology,2007,18(29):295701.

[34] PANDYA C V,VYAS P R,PANDYA T C,et al. An improved lattice mechanical model for FCC transition metals[J]. Physica B: Condensed matter,2001,307(1):138-149.

[35] CHANG I L,CHANG S H,HUANG J C. The theoretical model of fcc ultrathin film[J]. International journal of solids and structures,2007,44(18):5818-5828.

[36] ZHANG J H,HUANG Q A,YU H,et al. The influence of surface effects on size-dependent mechanical properties of silicon nano-beams at finite temperature[J]. Journal of physics D: Applied physics,2009,42(4):45409.

[37] ZHANG C,YAO Y,CHEN S. Size-dependent surface energy density of typically FCC metallic nanomaterials[J]. Computational materials science,2014,82:372-377.

[38] 秦福麒,梁立红,魏悦广. 金属薄膜弹性模量的尺度与温度效应[C]//2011 中国力学学会学术大会论文集. 哈尔滨:中国力学学会,2012.

[39] ZHOU J,BAI H L,JIANG E Y,et al. Bond-order-bond-length-bond-strength (bond-OLS) correlation mechanism for the shape-and-size dependence of a nanosolid[J]. Journal of physics: Condensed matter,2002,14(34):7781-7795.

[40] GHATAK A K,KOTHARI L S. An introduction to lattice dynamics [M]. MA:Addison-Wesley,1972.

[41] LEKHNITSKII S G,FERN P,BRANDSTATTER J J,et al. Theory of elasticity of an anisotropic elastic body[M]. Moscow: MirPublishers,1981.

[42] KRIVTSOV A M,MOROZOV N F. On mechanical characteristics of nanocrystals[J]. Physics of the solid state, 2002, 44(12): 2260-2265.

[43] CHEN K Y,ZHAO L R,TSE J S. Ab initio study of elastic properties of Ir and Ir3X compounds[J]. Journal of applied physics,2003,93(5):2414-2417.

(编辑 李坤璐)



